#### 研究成果報告書 科学研究費助成事業

今和 元 年 6 月 2 4 日現在

機関番号: 62603

研究種目: 基盤研究(B)(一般)

研究期間: 2015~2018 課題番号: 15H02672

研究課題名(和文)ベイズ統計と量子化学を基盤とする新薬候補分子の探索

研究課題名(英文)Data-driven predictive approach for designing drug molecules with Bayesian statistics and quantum chemistry

#### 研究代表者

吉田 亮 (Yoshida, Ryo)

統計数理研究所・データ科学研究系・教授

研究者番号:70401263

交付決定額(研究期間全体):(直接経費) 12,800,000円

研究成果の概要(和文):ベイズ推論を方法論の柱とし,所望の特性を有する新規分子を予測する機械学習アルゴリズムを開発した.実験やシミュレーションから得られるデータを用いて,物質の構造から物性の順方向の予測モデルを構築する.これに条件付き確率のベイズ則を適用し,物性から構造の逆方向のモデルを導き,逐次モンテカルロ法を用いてモデルから仮説物質を発生し,所望の物性を有する有機分子を設計する.R言語とPythonのオープンソース・ライブラリ(iQSPR、XenonPy)を開発した.さらに,同技術を用いて高熱伝導性高分子を設計し,従来比80%の高熱伝導率を持つ新規高分子の合成及び実験検証に成功した.

研究成果の学術的意義や社会的意義 同技術を用いることで,任意の物性をターゲットに大量かつ高品質の候補物質のライブラリを作製できるようになった.さらに,逆合成経路探索の機械学習アルゴリズムや計算機シミュレーションとの循環システムを構築すれば,候補物質の性能検証,合成経路のプランニングまでの工程を完全に自動化できる.解析技術は汎用的であり,薬剤分子のみならず,一般の低分子化合物,高分子、混合材料等,様々な材料系に適用できる.現在,物質科学とデータ科学の融合を図るマテリアルズインフォマティクス(MI)と呼ばれる学際領域に注目が集まっている.本研究がもたらした技術と科学的発見は,分子系材料のMIの学術創生に一石を投じるものである.

研究成果の概要(英文): Using Bayesian inference as a driving force technology, we have developed a machine learning algorithm for designing molecules. Given a data set from experiments or computer simulation, we derive machine learning models forwardly predicting physicochemical properties of given materials. Inverting such trained forward models through Bayes' law, we derive a posterior distribution for the backward prediction, which is conditioned by a desired property requirement. Exploring high-probability regions of the posterior with a sequential Monte Carlo technique, molecules that exhibit the desired properties can computationally be created. We have developed open source libraries of R and Python (iQSPR, XenonPy). With this technology, we designed promising hypothetical polymers targeting to achieve high thermal conductivity, and three were selected for monomer synthesis and polymerization. The synthesized polymers reached 80% higher thermal monomer synthesis and polymerization. The synthesized polymers reached 80% higher thermal conductivities than conventional commercial polymers.

研究分野: データ科学

キーワード:機械学習 量子化学計算 分子設計 マテリアルズインフォマティクス 転移学習

# 1.研究開始当初の背景

低分子有機化合物のケミカルスペースには、10<sup>60</sup> を超える候補物質が存在すると言われている.機能性分子の設計というタスクは,このような広大な探索空間から所望の特性を併せ持つ新規分子を予測することに帰着する.これは多目的の組み合わせ最適化の問題である.一般の工業品設計との違いは,パラメータ空間の高次元性と特殊性(パラメータ=分子の構造)にある.従来型の研究開発では,経験や勘に基づく設計,シミュレーションと実験による物性評価,設計指針の見直しという循環を延々と繰り返してきた.しかしながら,人知に基づく設計,計算,実験の循環だけは決して超えることができない壁が存在する.このような研究開発の循環にデータ科学の先進技術を導入し,研究の在り方を刷新する.このような構想の下で本研究を始動した.

#### 2.研究の目的

所望の特性を有する新規分子を予測する機械学習アルゴリズムを創出することを目指した、問題は、順問題と逆問題の形式に帰着する、順問題の目的は、系の入力Sに対する出力Yの予測である。本研究の文脈では、入力は分子、出力は物性(エネルギー、電子状態等)に相当する、従来型の研究では,第一原理計算や分子動力学計算等の"理論"が順方向の予測を担ってきた、このタスクを機械学習のサロゲートモデルに代替させる。これに対し、逆問題では文字通り逆方向の予測を行う、すなわち、出力Yの値(目標物性)を設定した上で、それを達成する入力Sの状態(分子)を予測する、データ科学の観点からみると、これらの計算は、化学構造の"表現・学習・生成"を行うことに相当する、記述子と呼ばれる特徴ベクトルを通して化学構造を"表現"し、データのパターンから構造から物性の数学的写像を"学習"する、さらに、計算機を用いて所望の物性値を有する分子を"生成"し、有望な候補物質を炙り出す、この一連のワークフローを包含するデータ科学の方法論を構築し、オープンソース・ソフトウェアの開発を推進する、

# 3.研究の方法

ベイズ推論を方法論の柱とし,新物質創製を目的に設計と合成を対象とする機械学習の手法を開発する.実験やシミュレーションから得られるデータを用いて,物質の構造から物性の順方向の予測モデルを構築する.これに条件付き確率のベイズ則を適用し,物性から構造の逆方向のモデルを導き,逐次モンテカルロ法を用いてモデルから仮説物質を発生し,所望の物性を有する埋蔵物質を炙り出す.以下では,順問題及び逆問題の研究の要点を示す.

# (a) 順問題:機械学習に基づく仮想スクリーニング,スモールデータ問題の克服

構造と物性の関係を表す実験や理論計算のデータから,物質Sの物性Yの予測モデルf(S)を導く.記述子と呼ばれる特徴ベクトルを通して物質の化学構造を"表現"し,データのパターンから構造から物性の数学的写像を"学習"する.記述子は MI における最も基本的な要素技術である.膨大な数の候補物質のライブラリを作製し,訓練済みモデルを用いてスクリーニングを行う.実験やシミュレーションに比べると機械学習のモデルは圧倒的に計算コストが低く,膨大な数の候補物質を対象に物性評価を行うことができる.

順問題のワークフローは極めてシンプルな計算であるが,多くの局面で我々はスモールデータの壁に直面する.機械学習の他の応用分野に比べると,一般に物質・材料研究のデータの量は圧倒的に少ない.原因として,次の三点が挙げられる:(i)データ取得の高コスト性.(ii)研究者のニーズが多様であるがゆえ,コモンデータが生まれにくい.(iii)競合相手に対する情報秘匿の意識が高く,データ公開に対するインセンティブが働きにくい.したがって,公共データベースの開発が中々進まないという土壌がある.先端領域に近づくにつれ,このような傾向は顕著になる.したがって,短中期的には,大学のラボや一企業で生産可能なデータ量が当該分野の標準になることが予想される.

我々は,スモールデータの壁を乗り越えるために,転移学習を軸に問題解決を図った.転移学習は,あるタスクで訓練されたモデルを別のタスクに流用することを目的とする.例えば,大量の画像データを用いて,動物の種類を判定するニューラルネットワークを訓練し,少数の花の画像データを用いて訓練済みモデルを改変し,花の種類の分類器を構築する.動物の分類器は,訓練の過程で画像認識に必要な汎用性の高い縮約特徴量を獲得していることが期待される.その一部は花の分類にも転用可能であると考えられる.花の分類器を一から学習するのではなく,少数のデータで動物の分類器を微修正すれば十分かもしれない.ヒトの脳には,少ない経験でも合理的な予測を行えるメカニズムが備わっている.例えば,小さい頃からピアノを学んでいた人は,音楽に関する一般的な知識を修得しているため,他の楽器の演奏技術を比較的容易に取得できる.このような推論プロセスを模倣したものが転移学習である.

#### (b) 逆問題:確率的言語モデルによる分子設計

実験や第一原理計算から得られた構造物性相関データを用いて,機械学習で構造から物性の順方向のモデルを構築する.これをベイズ則に従い反転させ,物性から構造の逆方向

の予測を導く、次に、逆方向のモデルから仮説構造を発生させ、所望の物性を有する埋蔵物質を発掘する。ここでの最も重要な要素技術は、化学構造の生成器である。本研究では、確率言語モデルを用いた独自の構造生成器を開発した、SMILESと呼ばれる記法で化学構造を文字列に変換し、既存の化合物を例題として確率的言語モデルの学習を行う。この過程で言語モデルは例題化合物の特徴的なパターン(部分構造やトポロジー)を読み解き、化学的にリアリティのある構造が生成可能となる。例題化合物を選択することで、様々な構造生成器を自動設計することができる。これを逐次モンテカルロ法のアルゴリズムにプラグインすることで、所望の物性を対象に分子設計を行う。

# 4. 研究成果

所望の物性を有する新規分子の予測を行う機械学習アルゴリズムを開発した.論文3では,ベイズ推論と第一原理計算を融合した分子設計のアルゴリズムを提案した.この解析技術を用いることで,任意の物性を目標に大量かつ高品質の候補物質ライブラリを作製できるようになった.さらに,第一原理計算のプログラムや我々が他のプロジェクトで開発している逆合成経路の探索アルゴリズムを導入することで,設計された候補分子の物性検証,合成経路のプランニングまでの工程を自動化できる.さらに,合成・実験検証との循環システムを構築できれば,将来的に短期間で大量の埋蔵物質を発掘できる可能性もある.

提案手法を実装した R 言語のパッケージ iQSPR を GitHub で公開している .また ,本グループが他のプロジェクトで開発している Python 統合解析プラットフォーム XenonPy に iQSPR の機能を移植した . XenonPy は , 有機分子だけではなく , 広範な物質を対象とするマテリアルズインフォマティクスの ALL-IN-ONE ソフトウェアである .記述子のライブラリ , 材料設計の機械学習アルゴリズム , 転移学習 , 訓練済みモデルライブラリ , 逆合成経路探索アルゴリズム ,第一原理計算や分子動力学計算とのインタフェース等が実装されている .

また我々は、当該分野で転移学習を戦略的に活用していくために、公共のデータベースや文献から網羅的にデータを抽出し、低分子・高分子・無機結晶の様々な物性をカバーする訓練済みモデルライブラリ XenonPy.MDL の開発を行った Materials Project(無機結晶)、PoLyInfo(高分子)、Polymer Genome(高分子)、QM9(低分子)等の構造物性相関データを抽出し、ネットワーク構造をランダムに改変した約13,000個の訓練済みモデルライブラリを作製した、さらに、ニューラルネットワークが獲得した特徴量を記述子として活用する転移学習のフレームワークを確立し、XenonPyに実装した、ヒトの脳との対比で言えば、多様で巨大な訓練済みモデル群を実装することは、多様な経験から記憶の集合体を構築することに相当する、モデルの多様性が増すほど、強力な転移学習を実現できる可能性がある、これがこのプロジェクトの構想である、

現在,これらの研究成果を基に産学の様々なパートナーと共に物質・材料科学の幅広い領域で実証研究を展開している。JST イノベーションハブ構築支援事業「情報統合型物質・材料開発イニシアティブ」では,森川淳子教授(東工大)らと共同で高伝熱性高分子材料を開発している。世界最大の高分子データベース PoLyInfo と iQSPR を組み合わせ,高熱伝導率をターゲットに 1,000 種類の仮想ライブラリを作成した。その中から三種類の芳香族ポリアミドを合成し,熱伝導率 0.41 W/mK に達する新規高分子を発見した(論文 1).これは,典型的なポリアミド系高分子と比較して最大 80%の性能向上に相当する。さらに,これらの材料は,高耐熱性や有機溶媒への溶解性,フィルム加工の容易性等,実用化のステージで求められる複数の要求特性を併せ持つことが実験的に確認された。このプロジェクトでは,転移学習が問題解決での突破口を切り拓いた。PoLyInfo には,熱伝導率のデータが 28 件しか登録されておらず、従来の機械学習では予測モデルを作れなかった。そこで,XenonPy.MDL に収録されている低分子化合物の比熱、ポリマーのガラス転移温度の訓練済み予測モデルを 28 件の熱伝導率のデータを用いて転移を行い、予測モデルを導くことに成功した。

# 5 . 主な発表論文等

#### [雑誌論文](計 6 件)

- 1. Wu, S., Kondo, Y., Kakimoto, M., Yang, B., Yamada, H., Kuwajima, I., Lambard, G., <u>Hongo, K.</u>, Xu, Y., Shiomi, J., Schick, C., Morikawa, J. and <u>Yoshida, R.</u> (2019) Machine-learning-assisted discovery of polymers with high thermal conductivity using a molecular design algorithm. npj Computational Materials, 5:5. doi: s41524-019-0203-2 查読有
- 2. Kawamura Y, Koyama S, <u>Yoshida R.</u> (2019) Statistical inference of the rate of RNA polymerase II elongation by total RNA sequencing. Bioinformatics. 35(11):1877-1884. doi: 10.1093/bioinformatics/bty886 查読有
- 3. <u>Yoshida, R.</u> (2018) Discussion on the paper by Professor Wu (A fresh look at effect aliasing and interactions: some new wine in old bottles), Annals of the Institute of Statistical Mathematics, 70(2):275–278. 查読無
- 4. 吉田 亮, 山田 寛尚, Chang Liu, Zhongliang Guo, Stephen Wu (2018) マテリアルズ・インフォ

- マティクス概説. 日本化学会情報化学部会誌, 36(1):9-13. 査読無 https://doi.org/10.11546/cicsi.36.9
- 5. Ikebata, H., <u>Hongo, K.</u>, Isomura, T., Maezono, R., <u>Yoshida, R.</u> (2017) Bayesian molecular design with a chemical language model, Journal of Computer-Aided Molecular Design. 31(4):379-391. doi: 10.1007/s10822-016-0008-z 查読有
- 6. <u>吉田 亮</u> (2016) 物性研究におけるデータ科学活用の現状と展望. 月刊機能材料, 36(9): 23-29. 査読無

## [学会発表](計 57 件)

- 1. 【基調講演】<u>吉田亮</u>, "マテリアルズインフォマティクスの最前線", 日本化学会第 99 春季年会 2019 (2019.3)
- 2. 【招待講演】<u>吉田亮</u>, "高分子データベース・機械学習を活用した高機能高分子材料の設計 及び合成", 高分子学会講演会 高分子開発における MI・AI・計算科学からのアプローチ (2019.2)
- 【特別講演】 <u>吉田亮</u>, "マテリアルズインフォマティクスの現状と展望:データサイエンスの視点から", nano tech 2019 国際ナノテクノロジー総合展・技術会議 (2019.2)
- 4. 【招待講演】 Ryo Yoshida, "Machine Learning for Accelerated Materials Discovery", ICMMA2018 (2019.2)
- 5. 【基調講演】<u>吉田亮</u>, "Accelerated Materials Discovery Powered by Machine Learning", The 12th SPSJ International Polymer Conference (IPC2018) (2018.12)
- 6. 【招待講演】<u>吉田亮</u>, "マテリアルズインフォマティクスの最前線", 科学研究費シンポジウム「予測モデリングとその周辺 -機械学習・統計科学・情報理論からのアプローチ-」 (2018.11)
- 7. 【特別講演】吉田亮, "データサイエンスを活用して薬剤分子を設計・合成する", 統計数 理研究所公開講演会 創薬のフロンティア: データサイエンスの挑戦 (2018.11)
- 8. 【特別講演】<u>吉田亮</u>, "材料・デバイス開発のゲームチェンジ ~ マテリアルインフォマティクスへの挑戦", パナソニック創業 100 周年記念 CROSS-VALUE INNOVATION FORUM 2018 (2018.10)
- 9. 【招待講演】吉田亮, "SPACIER: 材料シミュレーションと機械学習の融合", 一般財団法 人 高度情報科学技術研究機構 第6回材料系ワークショップ (2018.10)
- 10. 【招待講演】 Ryo Yoshida, "Accelerated Materials Discovery Powered by Machine Learning", 10th International Workshop on Combinatorial Materials Science and Technology (COMBI2018) (2018.10)
- 11. 【基調講演】吉田亮, "マテリアルズインフォマティクスの最前線", 日本金属学会 2018 年 秋期(第163回)講演大会 (2018.9)
- 12. 【特別講演】吉田亮, "機械学習の最前線:物質科学における応用事例を中心に", 大阪大学数理・データ科学教育研究センター データ科学特論 II (2018.8)
- 13. 【基調講演】 Ryo Yoshida, "Frontiers of Applied Bayesian Inference", The 10th MEI3 Center International Symposium (2018.8)
- 14. 【招待講演】<u>吉田亮</u>, "最先端データ科学を活用した材料開発", 第 3 回 CDMSI 研究会 (2018.7)
- 15. 【招待講演】<u>吉田亮</u>, "データ科学の視点から見た次世代のものづくりの在り方:材料研究の事例を中心に", 応用数理ものづくり研究会 第 24 回技術セミナー (2018.6)
- 16. 【特別講演】吉田亮, "マテリアルズ・インフォマティクス~次世代のものづくり~", 第 67 回高分子学会年次大会 JSR 創立 60 周年記念シンポジウム (2018.5)
- 17. 【招待講演】<u>吉田亮</u>, "マテリアルズインフォマティクスの最前線", 2018 年度応用統計学フロンティアセミナー データサイエンスによる「ものつくり」の革新 (2018.5)
- 18. 【招待講演】吉田亮, "データ科学の先進技術がもたらす材料研究の在り方", 近畿科学協会 エレクトロニクス部会 平成 30 年度第1回研究会 (2018.5)
- 19. 【基調講演】 Ryo Yoshida, "Materials Informatics: State-of-the-Art and Future Perspectives", 6th International IBM Cloud Academy Conference 2018 (2018.5)
- 20. 【国際·招待講演】 Ryo Yoshida, "Inverse design of novel polymeric materials through Bayesian machine learning and experimental design algorithms", 255th ACS National Meeting (2018.3)
- 21. 【国内・招待講演】<u>吉田亮</u>, "物質構造の表現・学習・生成・合成", データ科学との融合に よる化学の新展開 (2018.3)
- 22. 【国内・招待講演】吉田亮, "機械学習による新物質探索", 第22回準結晶研究会(2018.3)
- 23. 【国内・チュートリアル】 吉田亮, "物質・材料研究におけるデータ科学活用の現状と手法", サイエンス&テクノロジー マテリアルズ・インフォマティクスの最前線 (2018.2)
- 24. 【国内・招待講演】吉田亮, "Materials Informatics: State-of-the-Art and Future Perspectives", 第 2 回 JAIST-ISM シンポジウム + KIST (2018.1)
- 25. 【国内・チュートリアル】<u>吉田亮</u>,"マテリアルズインフォマティクスの最前線",情報機構機械学習 マテリアルズインフォマティクス セミナー (2018.1)
- 26. 【国内・チュートリアル】吉田亮、"ものづくり×データ科学: 材料開発の事例を中心に", 日

本機械学会 工学とインフォマティクス ~ 最適化からビックデータ活用まで~ 講習会 (2017.12)

- 27. 【国内・基調講演】吉田亮, "データ科学がもたらす次世代のものづくり: 創造的設計と製造", 第 10 回スーパーコンピューティング技術産業応用シンポジウム (2017.12)
- 28. 【国内・特別講義】 吉田亮, "機械学習の最前線", 慶応義塾大学データサイエンス特別講義 (2017.11)
- 29. 【国内・招待講演】吉田亮, "データ科学の先進技術がもたらす次世代ものづくり: 創造的設計と製造", 日本品質管理学会 第 47 回年次大会研究発表会 (2017.11)
- 30. 【国際·招待講演】Ryo Yoshida, "Materials informatics: an emerging interdisciplinary field of materials science", Advances in Neuroinformatics (AINI) 2017 (2017.11)
- 31. 【国際·招待講演】Ryo Yoshida, "Materials Informatics: an emerging interdisciplinary field of materials science", Advances in Neuroinformatics (AINI) 2017 (2017.11)
- 32. 【国際·招待講演】Y. Iino\*, T. Nagashima, H. Sato, MS. Jang, S. Oe, Y. Toyoshima, M. Tomioka, H. Kunitomo, S. Wu, <u>R. Yoshida</u>, Y. Iwasaki, T. Ishihara, "How taste preference is modulated in the nematode", The 16th International Symposium on Molecular and Neural Mechanisms of Taste and Olfactory Perception (2017.11)
- 33. 【国内・招待講演】吉田亮, "マテリアルズインフォマティクスの最前線", サイエンティフィック・システム研究会 科学技術計算分科会 2017 年度会合 (2017.10)
- 34. 【国内・招待講演】吉田亮, "データ科学の先進技術がもたらす次世代の材料研究", 17-1 高分子計算機科学研究会 (2017.10)
- 35. 【国内・招待講演】<u>吉田亮</u>, "データ科学の先進技術がもたらす材料開発手法の革新", 第7回 CSJ 化学フェスタ 2017 (2017.10)
- 36. 【国内・招待講演】吉田亮, "機械学習によるデータ駆動型サイエンス: 現状と展望", 第 55 回 日本生物物理学会年会 (2017.9)
- 37. 【国内・招待講演】<u>吉田亮</u>, "外挿的予測と発見のデータ科学:機械学習で新物質を発見する", 日本学術振興会 マイクロビームアナリシス第 141 委員会 第 169 回研究会 (2017.8)
- 38. 【国内・招待講演】吉田亮,"データ科学がもたらす新しいサイエンス:外挿的予測と発見",名古屋大学大学院医学系研究科 平成 29 年度基盤医学特論 特徴あるプログラム オミクス解析学プログラム (2017.8)
- 39. 【国内・チュートリアル】<u>吉田亮</u>, "機械学習による物質探索と材料開発技術", 技術情報協会 セミナーNo.707214 (2017.7)
- 40. 【国内・チュートリアル】<u>吉田亮</u>, "マテリアルズインフォマティクス概論:基礎と応用", MI2I チュートリアルセミナー (第 5 回) (2017.7)
- 41. 【国内・招待講演】<u>吉田亮</u>, "シミュレーションとデータサイエンス:機械学習で新物質を発見する", シミュレーションとベイズモデリング (岩波データサイエンス Vol.6 刊行記念 (2017.7)
- 42. 【国内】吉田亮, "データ科学の先進技術がもたらす次世代のものづくり: 創造的設計と製造", 統計数理研究所 データ科学がもたらす「ものづくり」革新 創造的設計と製造 (2017.6)
- 43. 【国内・一般講演】Guillaume Lambard\*, Ekaterina Gracheva, Stephen Wu, Ryo Yoshida, "Inverse design of functional materials: advanced machine learning techniques coupled to computational experiments", 東北大学流体科学研究所 東北大学材料科学高等研究所 統計 数理研究所 合同ワークショップ (2017.4)
- 44. 【国際·招待講演】Guillaume Lambard\*, Stephen Wu, Ryo Yoshida, "Inverse design of functional materials: advanced machine learning techniques coupled to computational experiments", International Workshop of Materials Informatics and Materials Data (MIMD) (2017.4)
- 45. 【チュートリアルセミナー】 <u>吉田亮</u>,"機械学習に基づく物質探索・材料設計:現状と展望~マテリアルズインフォマティクスにおけるデータ科学活用~",情報機構 機械学習マテリアルズインフォマティクス セミナー (2017.3)
- 46. 【講義】吉田亮, "マテリアルズインフォマティクス:機械学習による新物質探索", 統計数 理研究所 H28 年度統計思考力育成事業 機械学習速習コース (2017.3)
- 47. 【招待講演】 Ryo Yoshida, "Inverse design of functional materials through computer experiments and machine learning", Simulations Encounter with Data Science Data Assimilation, Emulators, Rare Events and Design (2017.3)
- 48. 【招待講演】吉田亮, "機械学習による物質探索と材料開発", 日本表面科学会 表面科学セミナー2017 (2017.2)
- 49. 【招待講演】 Ryo Yoshida, "Inverse design of functional materials through computer experiments and machine learning", ISM-ZIB-IMI Joint Workshop on Optimization and Data-intensive High Performance Computing (2017.1)
- 50. 【招待講演】吉田亮, "マテリアルズインフォマティクス:物質科学におけるシミュレーションとデータ科学の融合", 理研データ同化ワークショップ (2016.10)
- 51. 【招待講演】<u>吉田亮</u>,"ベイジアンアプローチに基づく情報統合型物質・材料探索",日本応 用数理学会 2016 年度年会 (2016.9)

- 52. 【受賞講演】Hisaki Ikebata\*, <u>Kenta Hongo</u>, Tetsu Isomura, Ryo Maezono, <u>Ryo Yoshida</u>, "Bayesian design of bioactive molecules with a chemical language model", 第 5 回生命医薬情報 学連合大会(IIBMP2016)(2016.9)
- 53. 【招待講演】吉田亮, "物質・材料科学における機械学習の先端応用:現状と展望", 第1回 スーパーコンピューティング・セミナー (2016.9)
- 54. <u>吉田亮</u>, "物質・材料探索における機械学習の先端応用ー現状と展望", 第3回 MI2I フォーラム (2016.9)
- 55. 【特別講演】吉田亮, "データ科学駆動型物質・材料探索 機械学習で薬剤分子を設計する", 統計数理研究所オープンハウス (2016.6)
- 56. 【招待講演】吉田亮, "情報統合型物質・材料開発におけるベイジアン・アプローチの可能性", 日本学術振興会主催 第 24 回研究会「進化する機械学習、データマイニング、ディープラーニング」 (2016.6)
- 57. 【招待講演】<u>吉田亮</u>, "ベイジアン・アプローチに基づく情報統合型物質・材料探索", 海洋地球インフォマティクス 2016 (2016.5)

## 〔その他〕

ホームページ等

- 1. iQSPR (https://github.com/GLambard/inverse-molecular-design)
- 2. Xenopy: Python library for materials informatics (http://xenonpy.readthedocs.io/en/latest/)

#### 6.研究組織

(1)研究分担者

研究分担者氏名:本郷研太 ローマ字氏名:Kenta Hongo

所属研究機関名:北陸先端科学技術大学院大学

部局名:情報社会基盤研究センター

職名:准教授

研究者番号(8桁):60405040

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属されます。